

Két frekvenciával gerjesztett akusztikus kavitációs buborék alakstabilitási vizsgálata

The investigation of the spherical stability of an acoustic cavitation bubble excited by dual frequency

KLAPCSIK Kálmán¹, egyetemi adjunktus

HEGEDŰS Ferenc¹, egyetemi docens

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Gépészmérnöki Kar,
Hidrodinamikai Rendszerek Tanszék

H-1111, Budapest, Műegyetem rkp. 3. Tel.: +361-463-1680. Fax: +361-463-3091.
E-mail: kklapcsik@hds.bme.hu, fhegedus@hds.bme.hu Web: <http://www.hds.bme.hu>

Abstract

Thousands of micron-sized bubble in the liquid begin to oscillate under ultrasonic irradiation. The collapse of the oscillating bubbles can be so strong that the temperature inside the bubbles can reach several thousand degrees of Kelvin, which is beneficial for chemical reactions (sonochemistry). A limitation of the sonochemical application is the loss of the spherical shape of the bubble. The aim of the present research is to reveal the parameter spaces, where the shape of bubbles excited by dual frequency remains spherical.

Keywords: acoustic cavitation, sonochemistry, shape stability

Kivonat

Ultrahangos besugárzás hatására a folyadékban lévő, több ezer, mikron-méretű buborék pulzálni kezd. A pulzáló buborékok összeroppanása olyan erős lehet, hogy a buborék belsejében a hőmérséklet a több ezer Kelvin fokot is elérheti, ami kedvez a kémiai reakciók lejátszódásának (szonokémia). A szonokémiai felhasználás korlátja a buborék gömbi alakjának elvesztése. A jelen kutatás célja feltérképezni azokat a paramétertartományokat, ahol a buborék képes megőrizni a gömbi alakját két frekvenciás gerjesztés mellett.

Kulcsszavak: akusztikus kavitáció, szonokémia, alakstabilitás

1. BEVEZETÉS

Elegendően nagy intenzitású ultrahanggal besugárzott folyadékban a mikron méretű buborékok pulzálásuk során nagy méretre híznak, majd hirtelen összeroppannak. A jelenséget akusztikus kavitációnak nevezzük. Az összeroppanás során a buborék belsejében a nyomás és a hőmérséklet nagyon magas értékeket érhet el, ami kedvez különböző kémiai reakciók lejátszódásának. A buborék összeroppanás során lejátszódó kémia reakciók hasznosításával a kémia egy speciális területe, a szonokémia foglalkozik [1]. Például a szonokémiai reakciók útján keletkező reaktív szabadgyökökkel hatékonyan lehet veszélyes anyagokat (pl.: nehézfémeket) vagy baktériumokat degradálni/ártalmatlanítani. A szonokémiának egy másik lehetséges alkalmazási területe a nano-részecskék (pl.: TiO₂) vagy nano-ötvezetek gyártása, amelyek jól alkalmazhatók katalizátorként.

Az alkalmazások feltétele egy bizonyos összeroppanás-erősség elérése. A kutatócsoportunkban készült korábbi publikáció alapján [2] látható, hogy a kémiai kihozatal az összeroppanás erősség növekedésével és a buborékmérettel arányosan növekszik. A buborékméret növekedésnek egyik korlátja a buborék gömbi alakjának elvesztése. Ekkor a buborék felületén külső zavarás hatására felületi hullámok keletkeznek, amelyek időbeli növekedése a buborék gömbi alakjának elvesztéséhez, illetve a buborék felbomlásához vezet. A szonokémiai kutatások egyik fő kérdése napjainkban, hogy a kétfrekvenciás gerjesztés alkalmazásával tapasztalt magasabb kémiai kihozatalra elméleti magyarázatot adjanak. A jelen kutatásban azt vizsgáljuk, hogy

egy második gerjesztési frekvencia alkalmazásával a buborék gömbi alakja stabilizálható-e a kémiai kihozatal szempontjából szükséges összeroppanás erősség felett.

2. MATEMATIKAI MODELL

A buborék alakstabilitási vizsgálatának szokásos módja, hogy a gömbi buborék felületén zavarást írunk elő, aminek a növekedéséből vagy csökkenéséből lehet a stabilitására következtetni:

$$r(\theta, \vartheta, t) = R(t) + a_n(t)Y_n^m(\theta, \vartheta), \quad (1)$$

ahol $R(t)$ az időfüggő (gömbi) buboréksugár, $Y_n^m(\theta, \vartheta)$ n fokú és m rendű gömbi harmonikus függvény, $a_n(t)$ a zavarás időfüggő amplitúdója. Lineáris stabilitásvizsgálat esetén a felületi zavarások dinamikája független az m rendtől, továbbá egymástól független lineáris közönséges differenciálegyenlek írják le az n módusú $a_n(t)$ zavarások viselkedését [3]:

$$\ddot{a}_n + \left[3 \frac{\dot{R}}{R} - 2(n-1)(n+1)(n+2) \frac{\mu_L}{\rho_L R^2} + 2 \frac{n(n+2)^2}{1+2\delta/R} \frac{\mu_L}{\rho_L R^2} \right] \dot{a}_n + (n-1) \left[-\frac{\dot{R}}{R} + (n+1)(n+2) \frac{\sigma}{\rho_L R^3} + 2 \frac{\mu_L \dot{R}}{\rho_L R^3} \left((n+1)(n+2) - \frac{n(n+2)}{1+2\delta/R} \right) \right] a_n = 0, \quad (2)$$

ami a buboréklengés során keletkező örvényességet határréteg közelítéssel veszi figyelembe. A határrétegvastagságot kis buboréokra a gerjesztési frekvenciákkal definiált diffúziós hosszléptékek közül a nagyobbal azonosnak választjuk, nagy buborék esetén pedig egy mérettel arányos hossz felett levágjuk:

$$\delta = \min \left(\max \left(\sqrt{\frac{\mu_L}{\rho_L \omega_1}}, \sqrt{\frac{\mu_L}{\rho_L \omega_2}}, \frac{R}{2n} \right), \right) \quad (3)$$

ahol $\omega_1 = 2\pi f_1$ és $\omega_2 = 2\pi f_2$ a gerjesztő komponensek körfrekvenciái. A buboréksugár időbeli változását a Keller-Miksis egyenlet [4] írja le, ami figyelembe veszi a folyadék összenyomhatóságát is

$$\left(1 - \frac{\dot{R}}{c_L} \right) R \ddot{R} + \left(1 - \frac{\dot{R}}{3c_L} \right) \frac{3}{2} \dot{R}^2 = \left(1 + \frac{\dot{R}}{c_L} \frac{d}{dt} \right) \frac{(p_L - p_\infty(t))}{\rho_L}. \quad (4)$$

A (2)-(4) egyenletekben szereplő anyagjellemzők: $\mu_L = 8,902 \cdot 10^{-4}$ Pas a folyadék dinamikai viszkozitása, $\rho_L = 997,1$ kg/m³ a folyadék sűrűsége, $c_L = 1497,3$ m/s a hangsebesség a folyadékban, $\sigma = 0,072$ N/m a felületi feszültség. A buboréktól távoli nyomás az ultrahangos gerjesztésnek megfelelően

$$p_\infty(t) = P_\infty + p_{A1} \cdot \sin(\omega_1 t) + p_{A2} \cdot \sin(\omega_2 t + \theta), \quad (5)$$

ahol p_{A1} és p_{A2} az ultrahangos gerjesztő komponensek által létrehozott nyomásamplitúdó. $P_\infty = 1$ bar a környezeti nyomás, θ a fáziseltolás. A buborékfalnál a p_L a folyadék nyomás a határfelületre felírt mechanikai egyensúlyi egyenletből határozható meg

$$p_G + p_V = p_L + \frac{2\sigma}{R} + 4\mu_L \frac{\dot{R}}{R}. \quad (6)$$

Az (6) egyenlet bal oldala fejezik ki a buborék belsejében lévő nyomást, ami a $p_V = 3166,8$ Pa gőz és a p_G gáz parciális nyomásainak összege. A gázt politropikusnak feltételezve a gáz nyomása

$$p_G = \left(P_\infty - p_V + \frac{2\sigma}{R} \right) \left(\frac{R_E}{R} \right)^{3\gamma}, \quad (7)$$

ahol a politropikus kitevő $\gamma = 1,4$ (adiabatikus), és R_E az egyensúlyi buboréksugár. A numerikus megoldás érdekében a fenti egyenletrendszer dimenziótlan formára hozzuk dimenziótlan változók bevezetésével, amelyek az $x_1 = R/R_E$ a dimenziótlan buboréksugár, az $\alpha_{1,n} = a_n/R_E$ dimenziótlan zavarás-amplitúdó és a $\tau = t/(2\pi/\omega_1)$ a dimenziótlan idő szerinti deriváltak: $x'_1 = x_2$ illetve $\alpha'_{1,n} = \alpha_{2,n}$.

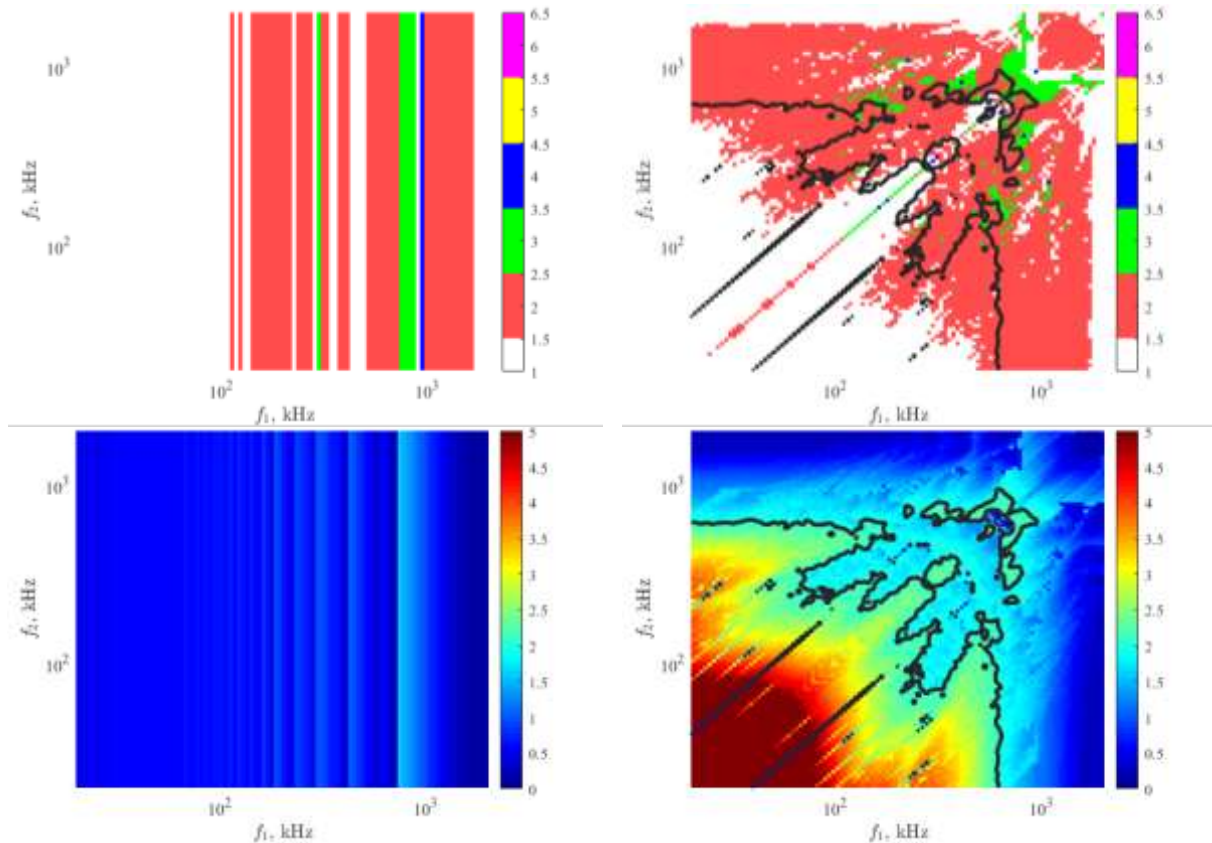
3. EREDMÉNYEK

A numerikus megoldás kezdeti érték megoldó alkalmazásával lehetséges. A kezdeti transziens számítás során megoldjuk a Keller-Miksis egyenletet a megoldást az egyensúlyi helyzetből indítva. A transziens időtartam hosszának 1024 egymást követő összeroppanás időtartamát tekintjük. A transziens tartomány elvetése után előírjuk a buborék zavarását (jelen szimulációkban $\alpha_{1,n}(0) = 1e-6$) és folytatjuk az integrációt az n módusra jellemző növekedési ráta meghatározása érdekében:

$$r_n = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \ln \left| \frac{\alpha_{1,n}(\tau)}{\alpha_{1,n}(0)} \right| \approx \frac{1}{\tau^*} \ln \left| \frac{\alpha_{1,n}(\tau^*)}{\alpha_{1,n}(0)} \right|, \quad (8)$$

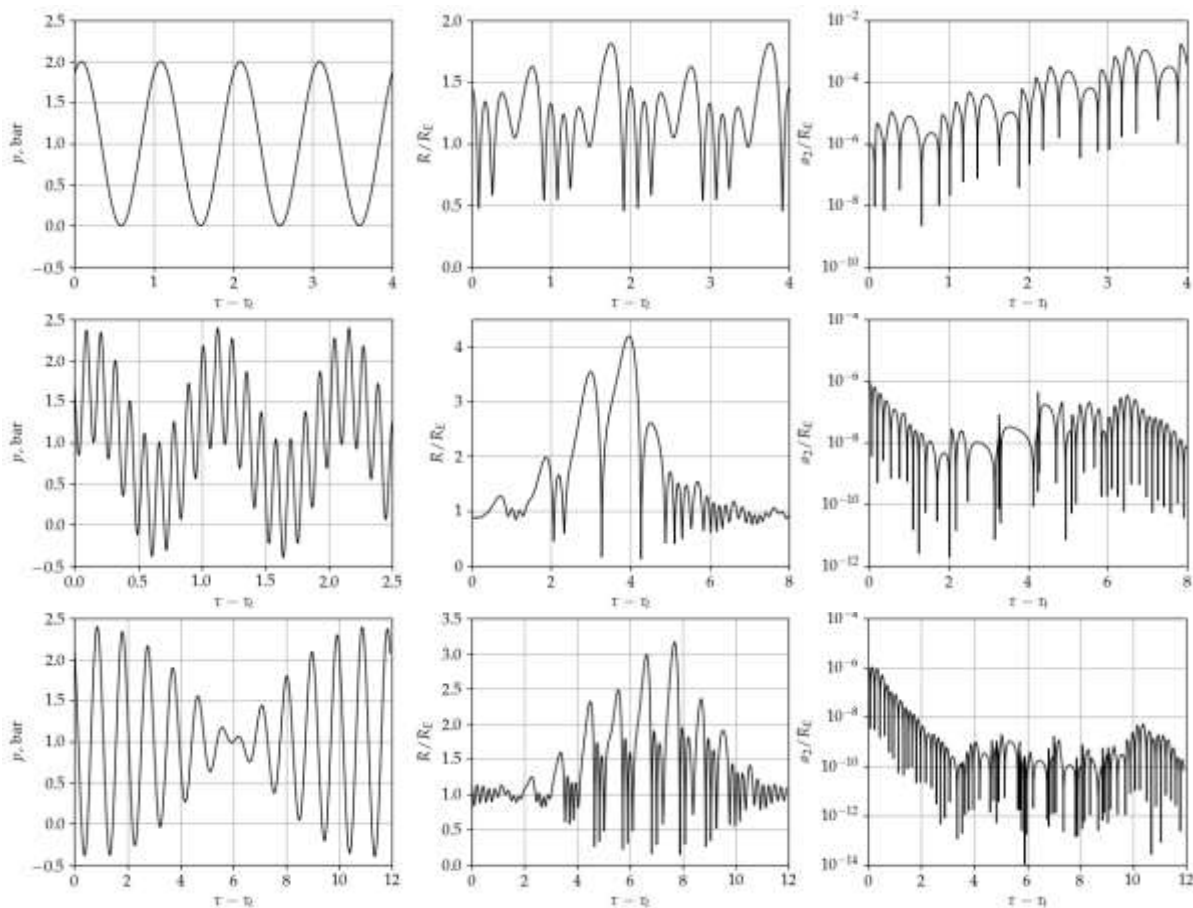
ahol τ^* -ot előzetes számítások alapján 256 egymást követő összeroppanáshoz szükséges időtartamnak választjuk, hogy a növekedési ráták meghatározása kellően pontos legyen. A numerikus szimulációk az MPGOS programcsomag közönséges differenciálegyenletek megoldására fejlesztett CUDA/C++ nyelven írt megoldóval készültek, amivel kihasználható a videokártyák nyújtotta nagy számítási kapacitás. Az 1. ábra $R_E = 3,5$ μ m egyensúlyi buboréksugár mellett készült numerikus szimuláció eredményeit mutatja. Az ábra első sorában a stabilitási térképek szerepelnek, ahol a fehér terület a stabil tartományt jelöli, míg a színes

területek az adott paraméterkombinációnál tapasztalt leginstabilabb módust jelöli. Az ábra második sora az összeroppanás erősség jellemzésére a számítás során elért legnagyobb $(R_{max} - R_E)/R_E$ expansziós viszonyt mutatja. A bal oldali diagramok az egyfrekvenciás gerjesztés esetét mutatják be ($p_{A1} = 1$ bar; $p_{A2} = 0$ bar), míg a jobb oldali diagramok kétfrekvenciás gerjesztést mutatnak be $p_{A1} = p_{A2} = 0,7$ bar esetre. Megjegyzendő, hogy a gerjesztés intenzitása a két esetben közel azonos $I \sim (p_{A1}^2 + p_{A2}^2)$. Az eredmények azt mutatják, hogy az egyfrekvenciás esetben 100 kHz feletti frekvencia tartományon a buborék kevésbé képes megőrizni a gömbi alakját. Továbbá, az alacsony frekvencia tartományon még 1 bar nyomásamplitúdó mellett sem figyelhető meg a „Giant Response” jelenséghez köthető erős összeroppanás, habár itt a buborék stabilitása fenntartható lenne. A kétfrekvenciás esetében elérhető az irodalomban elfogadott aktív kavitációs határ $(R_{max} - R_E)/R_E = 2$, amit az ábrákon a fekete szintgörbe is jelöl, úgy, hogy a buborék stabilitása megőrizhető.



1. ábra: A felső sor a leginstabilabb módust, az alsó sor az összeroppanás erősséget jellemző $(R_{max} - R_E)/R_E$ expansziós viszonyt ábrázolja. A bal oldali ábrák $p_{A1} = 1$ bar; $p_{A2} = 0$ bar, a jobb oldali ábrák $p_{A1} = p_{A2} = 0,7$ bar nyomásamplitúdó mellett készültek. A paramétertér felbontása $f_1 \times f_2 = 101 \times 101$.

A 2. ábra az egyfrekvenciás gerjesztésre (első sor) $f_1 = 240,45$ kHz mellett, a magas és alacsony frekvencia ($f_1 = 240,45$ kHz és $f_2 = 27,61$ kHz) kombinációk alkalmazására (második sor), illetve a két közeli, de nem azonos frekvenciájú ($f_1 = 240,45$ kHz és $f_2 = 219,30$ kHz) gerjesztésre (harmadik sor) mutat példát. Az oszlopok rendre: a gerjesztő nyomás, a dimenziótlan buboréksugár és a dimenziótlan hullámamplitúdó (második módus) a dimenziótlan idő függvényében. Az időtengely a tranziens szimulációk τ_t időtartamával eltolva látható. Egyfrekvenciás esetben látható, hogy a buboréksugár a növekedési fázisban egyszer sem éri el a kavitációs határt, azonban a második módusú zavarás amplitúdója időben folyamatosan növekszik. A kétfrekvenciás gerjesztéseknél tapasztalható kavitációs határ feletti $(R/R_E > 3)$ összeroppanás. Habár a nagy amplitúdójú lengéseknél a zavarás nem csökken, vagy akár kissé növekszik is, az erős összeroppanásokat követő kis amplitúdójú lengések ideje alatt a felületi hullám amplitúdója lecseng.



2. ábra: Időgörbék három különböző gerjesztési esetben.

4. ÖSSZEFOGLALÁS

A fenti példák azt mutatják, hogy stabil lengések kavitációs határ felett két esetben érhetőek el; két közeli, de nem azonos frekvencia alkalmazásával, illetve magas és alacsony frekvenciás gerjesztés együttes alkalmazásával. A legnagyobb összeroppanás erősség az alacsony frekvencia tartományban érhető el. Ebben a tartományban azonban Rayleigh-Taylor instabilitás [3] okozhat buborék szétesést. Másrészt az alkalmazásokhoz nem minden esetben szükséges a legnagyobb lehetséges összeroppanás erősséget elérni, hanem egy bizonyos optimális tartományon belül tartandó. A bemutatott eljárással lehetőség van szélesebb paramétertartományon vizsgálatokat folytatni.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-5-BME-152 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával, valamint a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (BO/00217/20/6) támogatásával készült.



IRODALOMJEGYZÉK

- [1] Yasui, K.: *Acoustic Cavitation and Bubble Dynamics*, Springer. 2018.
- [2] Kalmár, Cs., Klapcsik, K., Hegedűs, F.: *Relationship between the radial dynamics and the chemical production of a harmonically driven spherical bubble*, Ultrason. Sonochem., 64, 2020. 104989.
- [3] Hao, Y., Prosperetti, A.: *The effect of viscosity on the spherical stability of oscillating gas bubbles*. Phys. Fluids 11(6), 1999. 1309-1317.
- [4] Keller, J. B., Miksis, M.: *Bubble oscillations of large amplitude*, J. Acoust. Soc. Am., 68 (2), 1980., 628-633.